

## Конформационные возмущения в дискретной модели молекулы ДНК

Мельников Владислав Юрьевич

Башкирский государственный университет

Закирьянов Фарит Кабирович

[peeli@mail.ru](mailto:peeli@mail.ru)

Целью исследования является моделирование процесса миграции конформационного возмущения вдоль молекулы ДНК. Молекула ДНК в развернутом виде похожа на механическую систему, состоящую из цепочки связанных маятников, причем каждый маятник может вращаться только в плоскости, перпендикулярной оси цепочки. Вращательные движения маятников в механической модели описываются хорошо известным уравнением синус-Гордона (1).

$$\varphi_{zz} - \varphi_{tt} = \sin \varphi \quad (1)$$

где  $\varphi$  – угловое отклонение,  $\varphi_{zz}, \varphi_{tt}$  – производные по координате и времени соответственно.

В данной работе используется Y-модель молекулы ДНК [1]. Для решения системы дифференциальных уравнений движения использован метод Рунге-Кутты четвёртого порядка [2].

При некоторых начальных условиях в начальный момент времени форма кинка имеет вид как показано на рис. 1а. В последующие моменты времени форма кинка принимает вид как на рис. 1б,в,г. Видно, что в определённый момент времени по причине неоднородности ДНК солитон останавливается и начинает двигаться назад, затем еще через некоторое время опять останавливается и начинает двигаться вперед, и так далее. Происходит пиннинг кинка – его «захват». Амплитуда колебаний кинка со временем постепенно уменьшается.

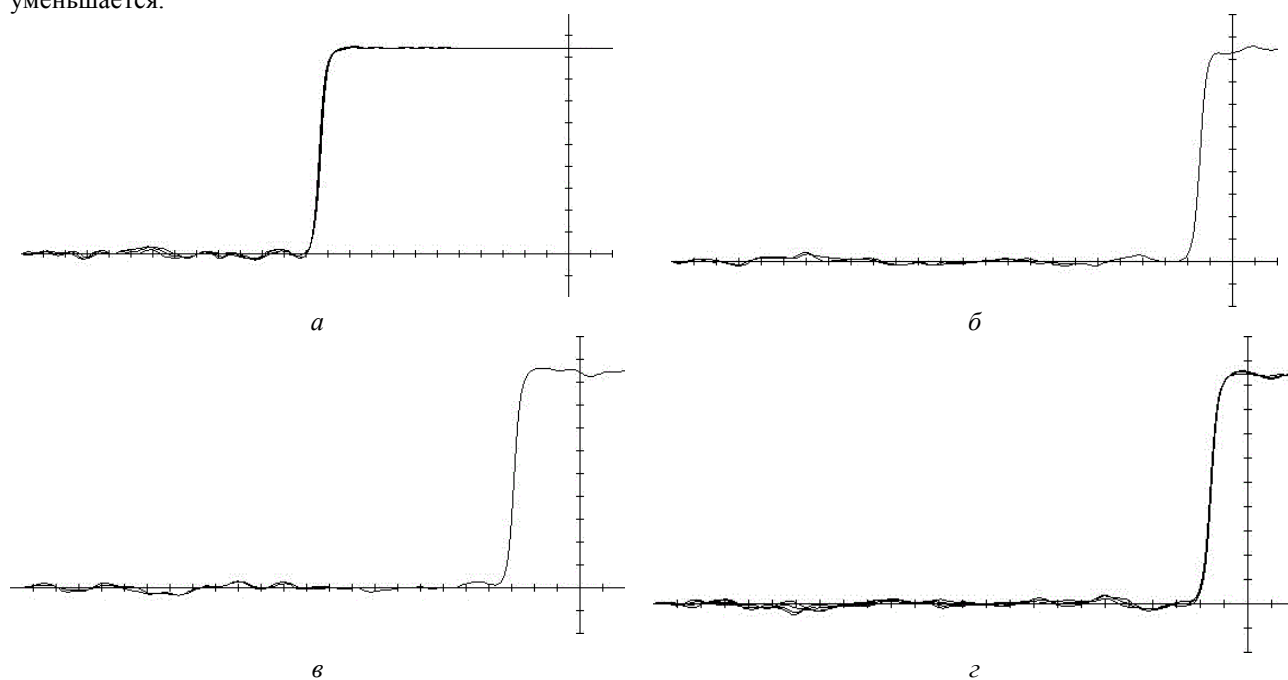


рис. 1. Форма кинка а)  $t = 0$  у.е., б)  $t = 10$  у.е., в)  $t = 12$  у.е., г)  $t = 14$  у.е.

При изменении начальных условий форма кинка будет иметь иную форму. Например, если задать начальную скорость солитона больше предыдущего, пиннинг кинка будет находиться дальше от начального положения. Если же задать другое начальное положение, пиннинг кинка также будет иметь иное положение.

Таким образом, задавая различные начальные условия, мы можем влиять на движения солитона.

Список публикаций:

[1] Якушев Л.В. *Нелинейная физика ДНК*. – М.: Ижевск: НИЦ «РХД». 2007. 252с.

[2] Alex Kasman. *DNA Solitons and Codon Bias*// Department of Mathematics, College of Charleston. P. 8.